

2019年3月28日(木) RIST東京事務所



第2回Quantum ESPRESSO入門講習会

高度情報科学技術研究機構(RIST)

利用支援部 吉澤香奈子

Outline

- MateriApps LIVE!の設定
- Quantum ESPRESSOについて
- 第一原理的電子状態計算
 - 擬ポテンシャルについて
 - 使う交換相関汎関数Excを決める
- ハンズオン実行準備
- QEのexamples(ハンズオン)
 - PW/examples/examples01: 実行テストと演習
 - CPV/example/examples01: 実行テスト
 - PHonon/example/examples01: 実行テストと演習
- サイズを大きくした計算例
- 「京」を中心としたHPCIにプリインストールされているアプリケーション
- 付録

MateriApps LIVE! とは？

- ・ MateriApps LIVE! ウェブサイト
<http://cm3i.github.io/MateriAppsLive/>
- ・ 仮想マシン(VirtualBox)上で直接ブートできるDebian Linux
 - ・ Windows、Macなどで利用可
 - ・ インストール作業なしで物質科学アプリを実行できる
- ・ 最新版: バージョン2.2 (2019年2月27日公開)
- ・ MateriAppsで紹介している公開アプリ・ツールを収録
 - ・ abinit, AkaiKKR, ALPS, CP2K, Feram ,ERmod, DCore, DSQSS, HΦ, LAMMPS, mVMC, OpenMX, Quantum ESPRESSO, SMASH, xTAPP 等
 - ・ ParaView, Tapioca, VESTA, VMD, XCrysDen, ...
 - ・ GAMESS, VMDには自動インストーラーを準備
- ・ MateriApps LIVE!サイトからダウンロード可能
 - ・ 2013年7月以来、4500+コピーを配布

必要なファイルの準備

- ・ VirtualBox インストーラ: VirtualBox-*--OSX.dmg, VirtualBox-*--Win.exe
(<https://www.virtualbox.org/wiki/Downloads> からダウンロード可)
- ・ MateriApps LIVE! VitualBox 仮想ディスクイメージ: MateriAppsLive-* .ova
(<http://sourceforge.net/projects/materiappslive/files/> からダウンロード可)
- ・ ドキュメント:
README.html, README-en.html
[https://github.com/cm*si*/MateriAppsLive/wiki/MateriAppsLive-ova](https://github.com/cm<i>si</i>/MateriAppsLive/wiki/MateriAppsLive-ova)

VirtualBox からの起動方法

- ✓ USB メモリのファイルをパソコンに差し込む
- ✓ インストーラをダブルクリックして VirtualBox をインストール
 - ・ Windows版: [VirtualBox-5.2.26-128414-Win.exe](#)
 - ・ Mac版: [VirtualBox-5.2.26-128414-OSX.dmg](#)
 - ・ 途中の質問には適当に答える
- ✓ MateriApps LIVE! のインポート
 - ・ [MateriAppsLive-2.2-amd64.ova](#) をダブルクリック
 - ・ VirtualBox が起動してインポート画面が開くので、「インポート」ボタンを押す
 - ・ 2~3分かかるが完了するとマネージャーが起動
 - ・ ホスト (ホストOS) : もともと動いている OS (Windows、Mac OS X など)のこと
 - ・ 仮想マシン (ゲストOS) : VirtualBox の中で動いている OS (= MateriApps LIVE!)

VirtualBox の設定

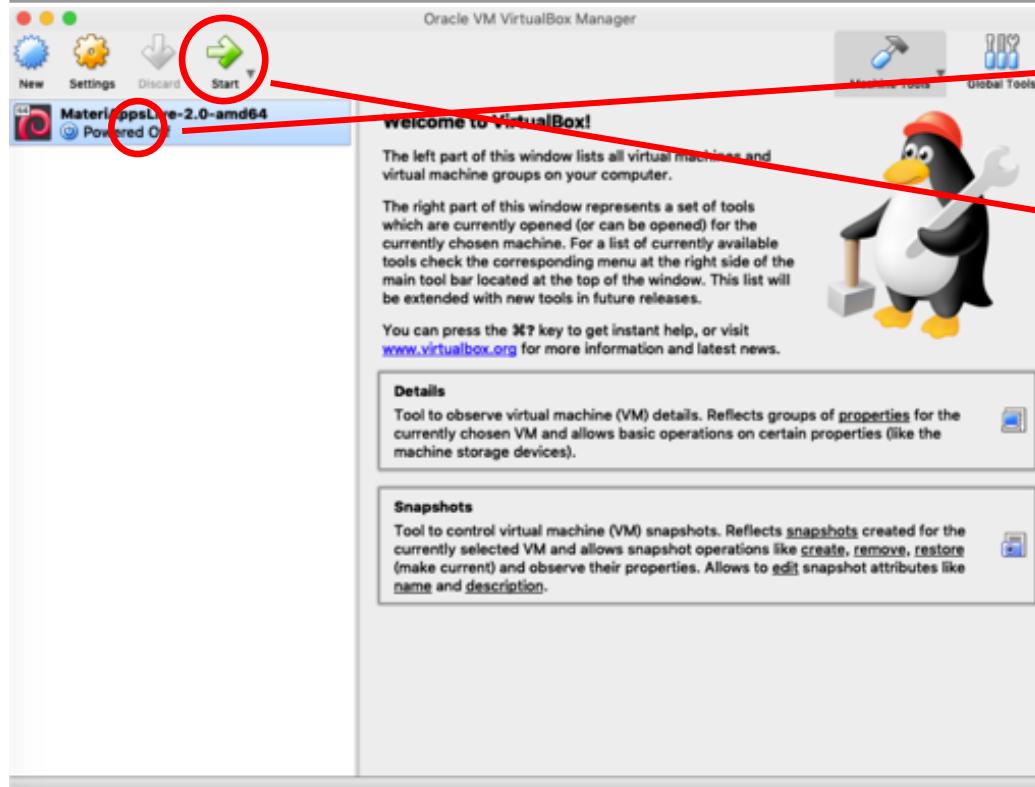
✓ 設定: 不要なポップアップメッセージを非表示にする

- Windows: USBメモリからコピーした `vbconfig.bat` をダブルクリック
- Mac OS X: `vbconfig.command` をダブルクリック
あるいはターミナルで「`sh vbconfig.command`」を実行

✓ 設定: ホストOSのディスクに仮想マシンからアクセスできるように

1. VirtualBox マネージャー画面で `MateriAppsLive-*` を選択し「設定」
2. 「共有フォルダー」タブを開き、右側の「+」(新規共有フォルダーを追加します)をクリック
3. 「フォルダーのパス」の右側の「v」マークをクリックし、「その他」を選択。さきほどUSBメモリからコピーしたフォルダーを選択する
4. 「自動マウント」をチェックし「OK」⇒ さらに「OK」
5. 仮想マシンを起動すると、3で選択したフォルダが、`/media/sf_...` の下に見える

VirtualBox からの起動

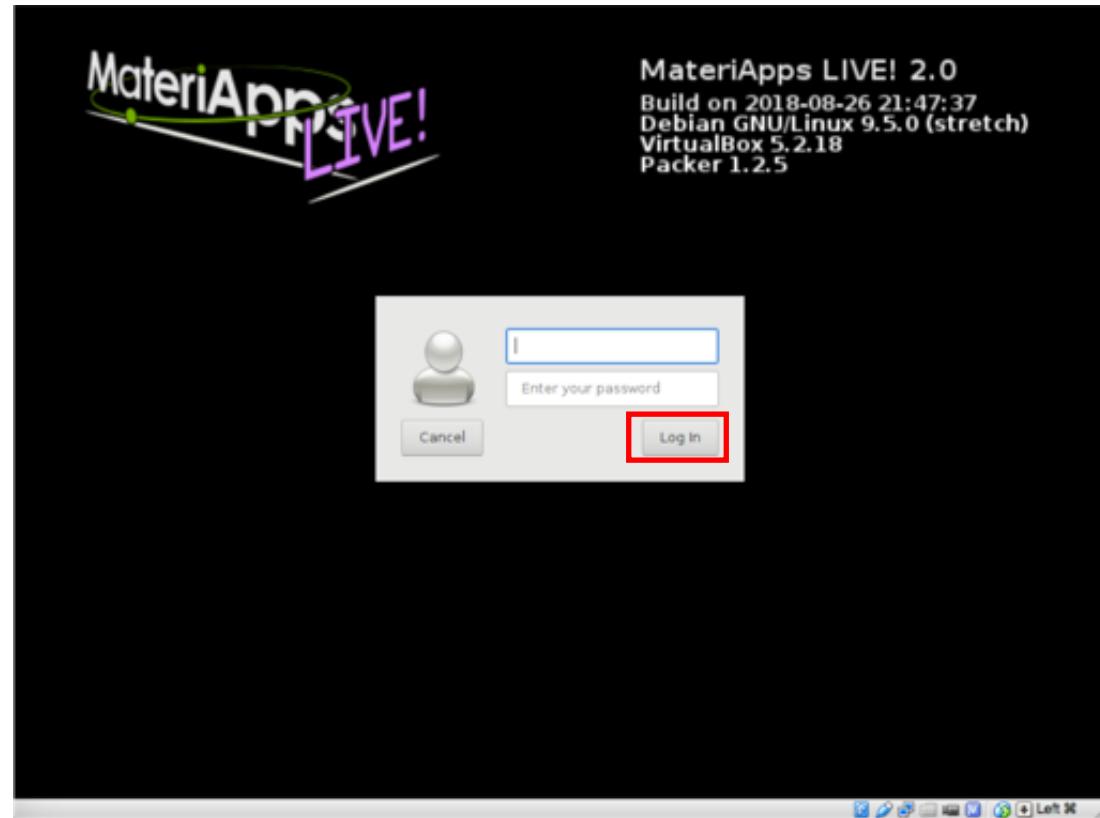


1. 「MateriAppsLive…」を選択
2. 起動ボタンを押す
3. ログイン画面ができるまでそのまま待つ

MateriApps LIVE!へのログイン

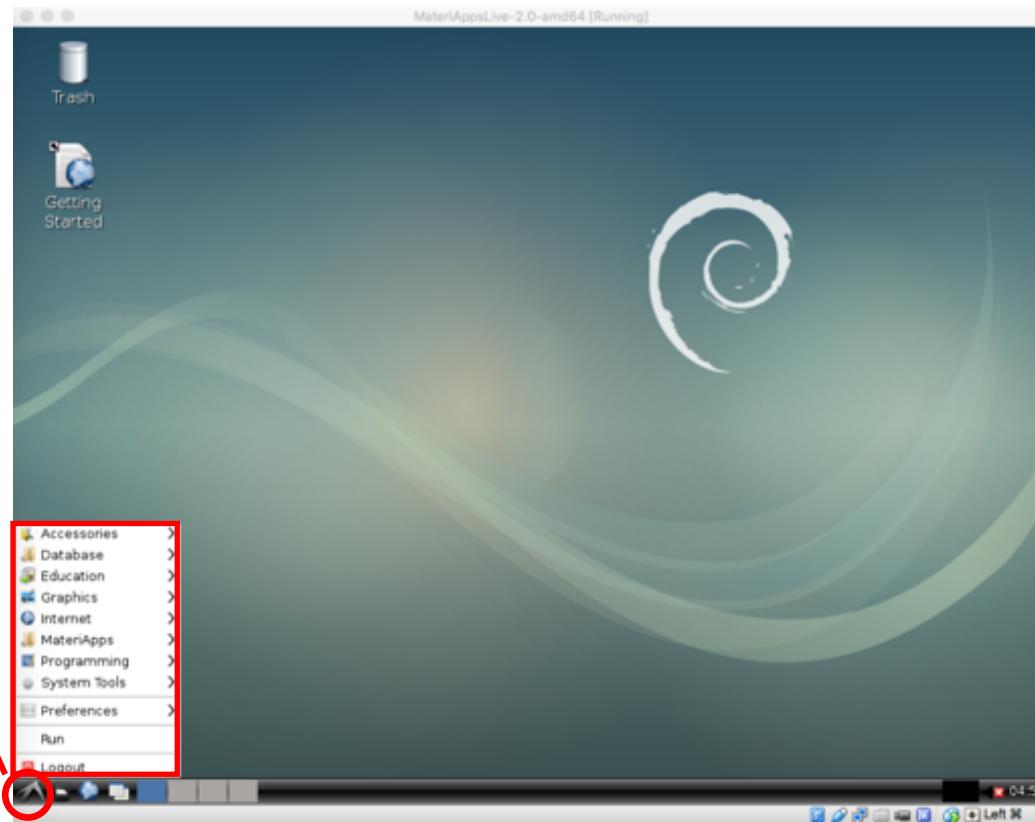
- しばらくすると下の画面のようなログイン画面が表示される
- 下記の情報を使ってログイン

- ユーザ名(login): *user*
- パスワード(password): *live*



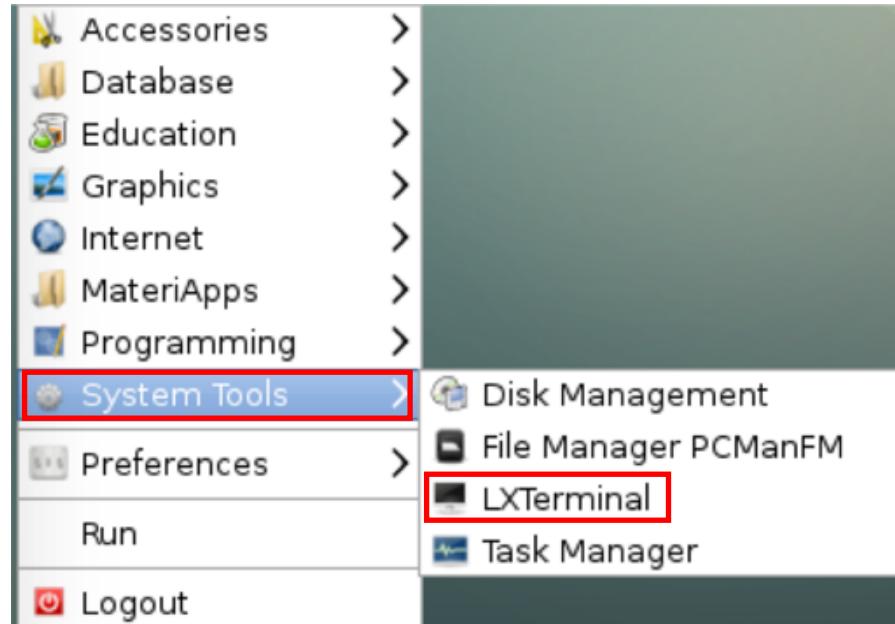
アプリケーションの起動

- ・スタートメニュー



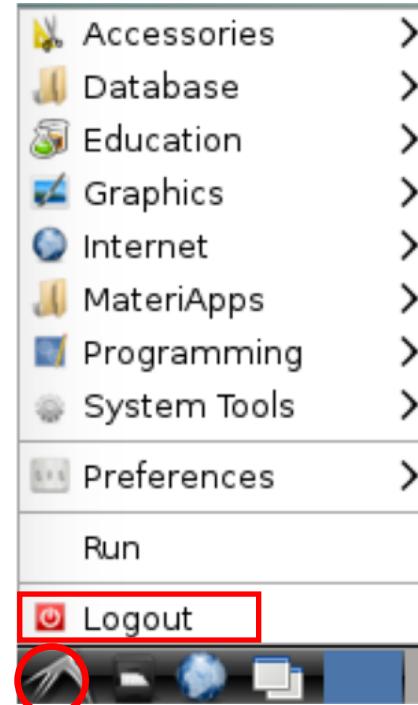
ターミナルの起動

- ・「スタートメニュー」
⇒「System Tools」
⇒「LXTerminal」



MateriApps LIVE! の終了

- ・「スタートメニュー」
⇒「Logout」
- ・下の画面の「Shutdown」選択



日本語キーボード、コピー&ペースト

- ・ 日本語キーボード(「@」が「P」の右にあるタイプ)では、記号が正しく入力できません。その場合、以下の設定を行ってください。
 - ・ 「スタートメニュー」⇒「System Tools」⇒「LXTerminal」
 - ・ ターミナル(端末)が立ち上がるるので「`setxkbmap -layout jp`」と入力しリターン
 - ・ 「@」が正しく入力できることを確認
 - ・ (英語配列に戻したいとき: 「`setxkbmap -layout us`」)
- ・ ホストOSでPDFファイルからコピーした文字列を、仮想マシンの端末でペーストする方法
 - ・ 端末上で右クリック ⇒「Paste」
 - ・ あるいは、「shift」と「control」を同時に押しながら「V」
 - ・ 文字列のコピーは、右クリック ⇒「Copy」あるいは「shift + control + C」

Quantum ESPRESSOについて(1)

- Quantum ESPRESSO(QE)
webサイト: <http://www.quantum-espresso.org/>
- PWscfの電子状態計算をベースとした材料モデリングのためのオープンソース統合パッケージ
 - PWscf(電子状態計算)、PWCOND(電気伝導度)
 - NEB(反応経路探索)
 - CPV(力-・パリネロMD)
 - PHonon(フォノン計算)
 - PP(電荷密度等の可視化用のファイルの作成)
 - TDDFPT(励起状態)
 - Xspectra(X線吸収スペクトル)

関連アプリ

- 多体摂動論(Yambo、WEST、BerkeleyGW)
- 拡散量子モンテカルロ法(CASINOインターフェース)
- 構造探索(PLUMED、USPEX、CALYPSO)

Quantum ESPRESSOについて(2)

- ソースコードダウンロード

<http://www.quantum-espresso.org/download>

最新版 (QE-6.4) : **2019年3月28日現在**

本講習会では、バージョン 6.3 を用いる。

- ドキュメント

General documentation

<http://www.quantum-espresso.org/resources/users-manual>

- PWscf User's Guide (v.6.4)

https://www.quantum-espresso.org/Doc/user_guide.pdf

- CP User's Guide (v.6.4)

http://www.quantum-espresso.org/Doc/cp_user_guide.pdf

- Phonon User's Guide (v.6.4)

http://www.quantum-espresso.org/Doc/ph_user_guide.pdf

- 入力パラメータの説明

Input data description

<https://www.quantum-espresso.org/resources/users-manual/input-data-description>

Quantum ESPRESSOについて(3)

- FAQ のページ

<http://www.quantum-espresso.org/resources/faq>

1. Installation
2. Pseudopotentials
3. Input data
4. Parallel execution
5. Frequent errors during execution
6. Self Consistency
7. Phonons

よく起こる(と報告のある)実行中のエラー

第一原理的電子状態計算

写実的に物質中の電子の性質を
シミュレートする計算

近似はする

- 電子↔電子相互作用 クーロン相互作用
- 電子↔原子核相互作用
- 電子の運動エネルギー $p^2/2m$
- 波動関数 連續空間上

第一原理計算の意義

写実性による定量的評価 → 実験とは独立な視点

- 原子構造(原子の配列)
↔ 格子モデル
 - 構造の安定性の評価、安定構造の予測
 - 化学反応における経路、活性化エネルギー
- 電子状態の理解、予測

Kohn-Sham方程式

- 密度汎関数法による第一原理計算の基本方程式
- 基底状態に関する理論。電子密度が基本変数。
- 多体問題を一体問題へ変換。
困難を交換相関汎関数 $Exc[\rho]$ にまとめる。

V_{eff} と ρ についてSCF計算

$$V_{eff}[\rho](r) = \int \frac{\rho(r')}{|r - r'|} dr' + \frac{\delta E_{xc}}{\delta \rho} + V_{ext}(r)$$

$$-\frac{1}{2} \Delta \psi_i + V_{eff} \psi_i = e_i \psi_i \quad \rho(r) = \sum_i \psi_i^*(r) \psi_i(r)$$

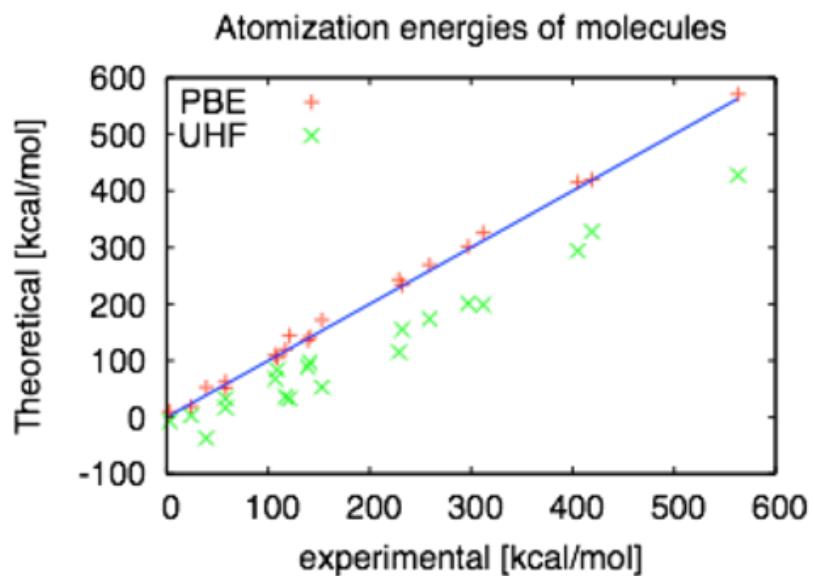
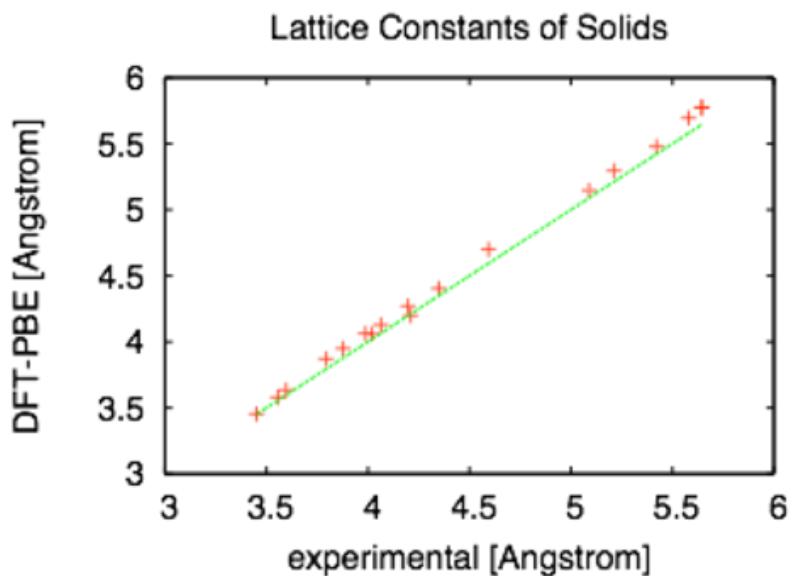
交換相関汎関数 E_{xc} の近似

仮想系の構成

- この手法の公式誤差を決める
 - 局所密度近似
 - 計算コスト小、経済的、広く実用
 - 交換相互作用を含む (hybrid汎関数)
 - 計算コスト大、開発途上、一部の系での改善
- 実用的でかつ万能の近似はない
▶ 究極の方法は見つかっていない

局所密度近似：実験との対応

精度評価の尺度



Li, Na, K, Al, C, Si, SiC, Ge, GaAs, NaCl, NaF, LiCl, LiF, MgO, Cu, Rh, Pd, Ag

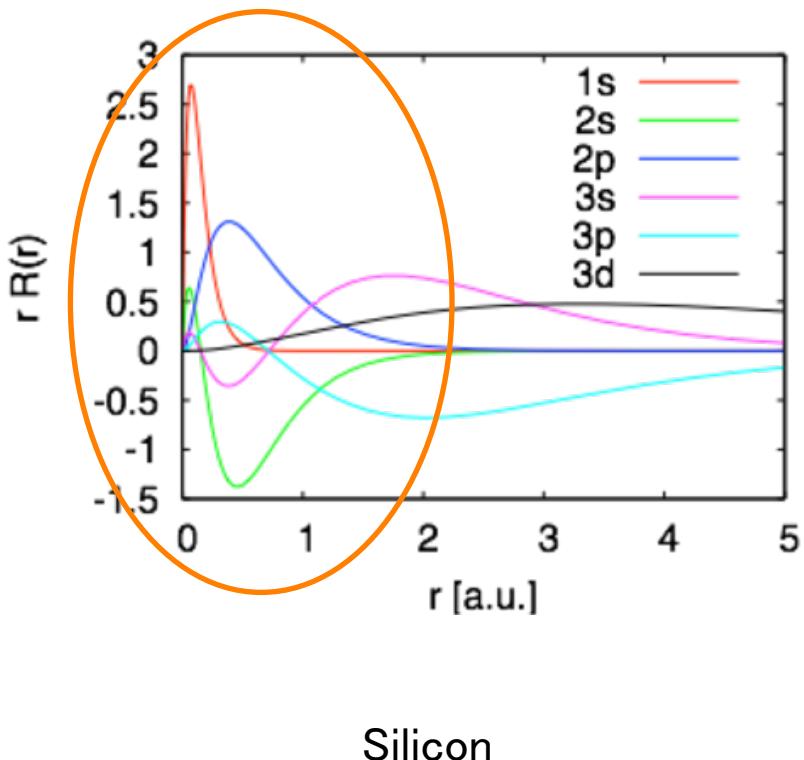
H₂, LiH, CH₄, OH, H₂O, HF, Li₂, LiF, Be₂, C₂H₂, HCN, CO, N₂, NO, O₂, F₂, P₂, Cl₂

密度汎関数法の特徴

- 安定構造に対する精度は相当
- 交換エネルギーまでも近似
- 経済的(HFと比較しても)

Hamiltonianの関数形

- 軌道関数に数値解析的な困難



原子核近傍に特異性

$$H = K + V$$

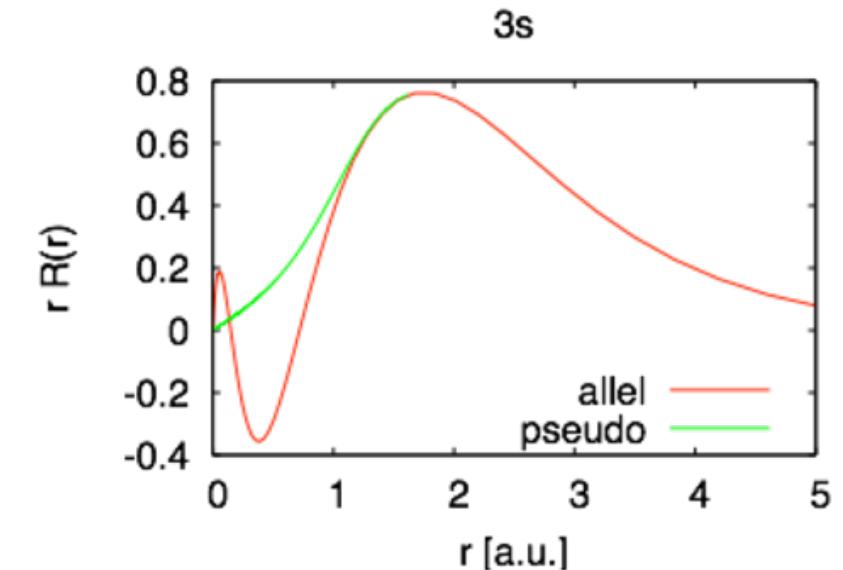
$$V(r) \propto -\frac{1}{r} \text{ に由来}$$

メッシュ間隔は1 a.u.程度

原子間隔は4 a.u.程度

対応の一つ: 擬ポテンシャル法

- 原子核位置にある特異性を除去: V, Ψ
- 芯の電子は取り除く。価電子だけ。
- おつりを打ち消す非局所ポテンシャル: V^{NL}



平面波基底による計算

– A die hard method

電子軌道 ψ を展開する基底関数の種類

- 実空間メッシュ(RSDFT)
- 実空間有限要素
- ガウス関数(Gaussian)
- 平面波(フーリエ変換)

平面波基底の良い点

空間的局在性を持たないのに使われる原因是？

- 周期境界条件の下で自然(結晶格子)
- 物体を並進しても精度が変化しない
 - 関数の微分について閉じている
- ほとんどすべての行列要素が厳密に得られる。定式化が単純にする。
- シミュレーションセルの形状変化への追随が簡単
- ハードウェアの利用効率が高い(BLAS3)

擬ポテンシャルについて

- 計算したい物質に対して擬ポテンシャルを用意する必要がある。
- 自分でも作れるが、最初は各コード用で用意しているものを使う。
- QE対応の擬ポテンシャル

<http://www.quantum-espresso.org/pseudopotentials>

各元素ごとのデータベースになっている

1 H																			2 He
3 Li	4 Be																		
11 Na	12 Mg																		
19 K	20 Ca																		
37 Rb	38 Sr																		
55 Cs	56 Ba	57-70		21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
87 Fr	88 Ra	89-102		39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
				71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
				103 Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt									
* Lanthanoids		57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb				
** Actinoids		89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No				

- 種類が多くあるが、最初はexamplesなどで用いられているものを試すと良い。
 - PSLibrary 1.0.0(PBE)
- <https://people.sissa.it/dalcorso/pslibrary/pslibrary.1.0.0.tar.gz>
を1セットもっていると便利かも知れない。

使う交換相関汎関数 E_{xc} を決める

- 通常は、一般化勾配近似相関汎関数PBE(Perdew, Burke, Ernzerhof)を用いる。

```
input_dft='PBE'
```

入力ファイルの書式例

- PBEで計算精度が悪い場合
→ Hybrid汎関数HSEなど、もっと精度の良い汎関数を用いる。
- 用いる汎関数 E_{xc} に合った擬ポテンシャルを用意する。
input_dft の値を指定しないと擬ポテンシャルファイルから読み込む。

ハンズオン実行準備

- MateriApps LIVE! を起動して、ログインし、ターミナル(LXTerminal)を起動する。
- ホームディレクトリに作業ディレクトリを作る。(例: \$HOME/qe)
\$ mkdir qe
- 作成した作業ディレクトリへ移動する。(\$HOME/qe)
\$ cd qe
- MateriApps LIVE! 上にあるExampleファイル(ディレクトリ)を作業ディレクトリにコピーする。
\$ cp -rp /usr/share/espresso/examples ./
- コピーした examples ディレクトリへ移動する。
\$ cd examples
- ディレクトリの中のファイルを確認する。
\$ ls
atomic CPV EPW GUI NEB PP PWCOND
COUPLE environment_variables FFTXlib GWW PHonon PW XSpectra

PWのexampleの実行テスト(1)

- PW/examples/example01 へ移動する。
 \$ cd PW/examples/example01
- ディレクトリの中のファイルの確認する。
 \$ ls
 README reference run_example
- run_example のシェルスクリプトを実行する
 \$./run_example

```
/home/user/qe/examples/PW/examples/example01 : starting
```

This example shows how to use pw.x to calculate the total energy and the band structure of four simple systems: Si, Al, Cu, Ni.

```
executables directory: /usr/bin
pseudo directory:    /usr/share/espresso/pseudo
temporary directory: /home/user/qe/examples/tempdir
checking that needed directories and files exist... done
```

```
running pw.x as: /usr/bin/pw.x -nk 1 -nd 1 -nb 1 -nt 1
```

PWのexampleの実行テスト(2)

```
running the scf calculation for Si... done  
running the band-structure calculation for Si... Done  
...  
running the scf calculation for Ni... done  
running the band-structure calculation for Ni... done  
cleaning /home/user/qe/examples/tempdir... done
```

```
/home/user/qe/examples/PW/examples/example01 : done
```

- 無事に終了すると results というディレクトリができる。

```
$ ls
```

```
README reference results run_example
```

- results へ移動する。

```
$ cd results
```

- al.scf.cg.in ファイルの中身を確認する。

```
$ cat al.scf.cg.in
```

PW/examples/example01(1)

AIの計算

入力ファイル: al.scf.cg.in

```
&control
  calculation='scf'
  restart_mode='from_scratch',
  pseudo_dir='/usr/share/espresso/pseudo/',
  outdir='/home/user/qe/examples/tempdir/',
  prefix='al'
  tprnfor = .true.
  tstress = .true.
/
&system
  ibrav= 2,
  celldm(1) =7.50,
  nat= 1,      原子数
  ntyp= 1,     原子種の数
  ecutwfc =15.0,
  occupations='smearing',
  smearing='marzari-vanderbilt',
  degauss=0.05
/
```

SCF計算をする。
calculationでは、scf, nscf, bands, relax, md, vc-relax, vc-md が指定できる。

SCF計算の後(SCF収束後)
tprnfor = .true. : forceの計算をする
tstress = .true. : stressの計算をする

セルの設定
ibrav= 2: fcc
格子定数: 7.5 a.u.

波動関数の運動エネルギー一カットオフ
Fermi面近傍の状態の電子の詰め方
(smearing)の設定

PW/examples/example01(2)

入力ファイル: al.scf.cg.in (続き)

```
&electrons  
    diagonalization='cg'  
    mixing_beta = 0.7  
/
```

```
ATOMIC_SPECIES
```

```
Al 26.98 Al.pz-vbc.UPF
```

```
ATOMIC_POSITIONS
```

```
Al 0.00 0.00 0.00 原子位置
```

```
K_POINTS
```

60 K点60点の座標

0.0625000	0.0625000	0.0625000
0.0625000	0.0625000	0.1875000
0.0625000	0.0625000	0.3125000
...		
0.3125000	0.5625000	0.5625000
0.4375000	0.4375000	0.4375000
0.4375000	0.4375000	0.5625000

固有値問題の反復法として
共役勾配法(CG)法を用い
る

擬ポテンシャルとして
Al.pz-vbc.UPF を用いる
26.98 は原子量

1.00	K点の重み
3.00	
3.00	
3.00	
1.00	
3.00	

入力パラメータについて(1)

https://www.quantum-espresso.org/Doc/INPUT_PW.html

このページを参照する。

Input File Description

Program: pw.x / PWscf / Quantum Espresso (version: 6.4)

TABLE OF CONTENTS

[INTRODUCTION](#)

[&CONTROL](#)

[calculation](#) | [title](#) | [verbosity](#) | [restart_mode](#) | [wf_collect](#) | [nstep](#) | [iprint](#) | [tstress](#) | [tprnfor](#) | [dt](#) | [outdir](#) | [wfcdir](#) | [prefix](#) | [lkpoint_dir](#) | [max_seconds](#) | [etot_conv_thr](#) | [forc_conv_thr](#) | [disk_io](#) | [pseudo_dir](#) | [tefield](#) | [dipfield](#) | [lfield](#) | [nberrycyc](#) | [lrbm](#) | [lberry](#) | [gdir](#) | [nopstr](#) | [lfcroot](#) | [gate](#)

[&SYSTEM](#)

[ibrav](#) | [celldm](#) | [A](#) | [B](#) | [C](#) | [cosAB](#) | [cosAC](#) | [cosBC](#) | [nat](#) | [ntyp](#) | [nbnd](#) | [tot_charge](#) | [starting_charge](#) | [tot_magnetization](#) | [starting_magnetization](#) | [ecutwfc](#) | [ecutrho](#) | [ecutlock](#) | [nr1](#) | [nr2](#) | [nr3](#) | [nr1s](#) | [nr2s](#) | [nr3s](#) | [nosym](#) | [nosym_evc](#) | [no_t_rev](#) | [force_symmorphic](#) | [use_all_frac](#) | [occupations](#) | [one_atom_occupations](#) | [starting_spin_angle](#) | [degauss](#) | [smearing](#) | [nspin](#) | [noncolin](#) | [ecfixed](#) | [qcutz](#) | [q2sigma](#) | [input_dft](#) | [exx_fraction](#) | [screening_parameter](#) | [exxdiv_treatment](#) | [x_gamma_extrapolation](#) | [ecutvcut](#) | [nqx1](#) | [nqx2](#) | [nqx3](#) | [localization_thr](#) | [lda_plus_u](#) | [lda_plus_u_kind](#) | [Hubbard_U](#) | [Hubbard_J0](#) | [Hubbard_alpha](#) | [Hubbard_beta](#) | [Hubbard_J](#) | [starting_ns_eigenvalue](#) | [U_projection_type](#) | [edir](#) | [emaxpos](#) | [eopreg](#) | [eamp](#) | [angle1](#) | [angle2](#) | [lforce](#) | [constrained_magnetization](#) | [fixed_magnetization](#) | [lambda](#) | [report](#) | [lspinorb](#) | [assume_isolated](#) | [esm_bc](#) | [esm_w](#) | [esm_efield](#) | [esm_nfit](#) | [fcf_mu](#) | [vdw_corr](#) | [london](#) | [london_s6](#) | [london_c6](#) | [london_rvdw](#) | [london_rout](#) | [dftd3_version](#) | [dftd3_threebody](#) | [ts_vdw_econv_thr](#) | [ts_vdw_isolated](#) | [xdm](#) | [xdm_a1](#) | [xdm_a2](#) | [space_group](#) | [uniqueb](#) | [origin_choice](#) | [rhombohedral](#) | [zgate](#) | [relaxz](#) | [block](#) | [block_1](#) | [block_2](#) | [block_height](#)

[&ELECTRONS](#)

[electron_maxstep](#) | [scf_must_converge](#) | [conv_thr](#) | [adaptive_thr](#) | [conv_thr_init](#) | [conv_thr_multi](#) | [mixing_mode](#) | [mixing_beta](#) | [mixing_ndim](#) | [mixing_fixed_ns](#) | [diagonalization](#) | [ortho_para](#)

入力パラメータについて(2)

Namelist: &CONTROL

calculation

CHARACTER

Default: 'scf'

A string describing the task to be performed. Options are:

'scf'

'nscf'

'bands'

'relax'

'md'

'vc-relax'

'vc-md'

(vc = variable-cell).

calculationというパラメータを指定しないと、デフォルト値の'scf'が設定される。

入力パラメータについて(3)

```
&control
/
&system
    ibrav= 2, celldm(1) =7.50, nat= 1, ntyp= 1, ecutwfc =15.0,
    occupations='smearing', smearing='marzari-vanderbilt', degauss=0.05
/
&electrons
/
ATOMIC_SPECIES
Al 26.98 Al.pz-vbc.UPF
ATOMIC_POSITIONS
Al 0.00 0.00 0.00
K_POINTS
60
0.0625000 0.0625000 0.0625000 1.00
0.0625000 0.0625000 0.1875000 3.00
...
...
```

al.scf.cg.in は、最低限これだけでも動く

(注)デフォルトの値が良いとは限らないので、必ず結果はチェックする。

PWのexampleの実行(1)

- PW/examples/example01/results の中のファイルの確認

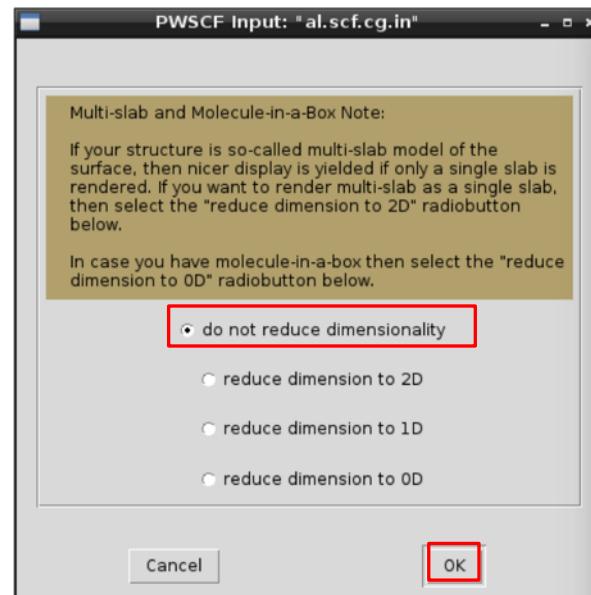
\$ ls

```
al.band.cg.in  cu.band.cg.in  ni.band.cg.in  si.band.cg.in
al.band.cg.out cu.band.cg.out  ni.band.cg.out  si.band.cg.out
al.band.david.in cu.band.david.in ni.band.david.in si.band.david.in
al.band.david.out cu.band.david.out ni.band.david.out si.band.david.out
al.scf.cg.in    cu.scf.cg.in   ni.scf.cg.in   si.scf.cg.in
al.scf.cg.out   cu.scf.cg.out  ni.scf.cg.out  si.scf.cg.out
al.scf.david.in cu.scf.david.in ni.scf.david.in si.scf.david.in
al.scf.david.out cu.scf.david.out ni.scf.david.out si.scf.david.out
```

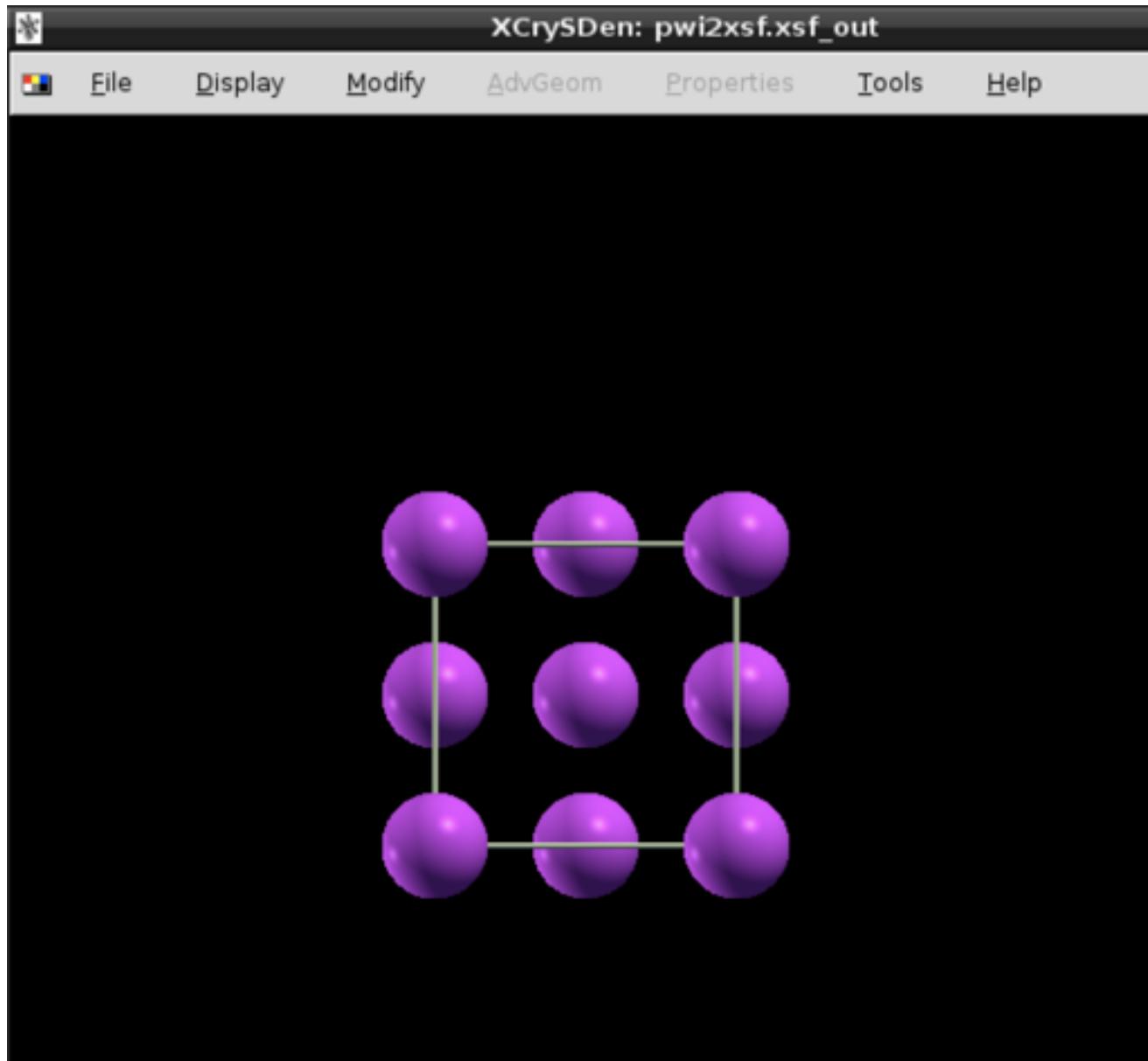
この中で、今回 al.scf.cg.in を計算する。

- 計算する物質の確認(可視化)

\$ xcrysden --pwi al.scf.cg.in



PWのexampleの実行(2)



Xcrysdenで
計算ターゲットを
確認

PWのexampleの実行(3)

- al.scf.cg.in の実行

```
$ pw.x < al.scf.cg.in
```

Program PWSCF v.6.3 starts on 27Mar2019 at 14: 0:53

This program is part of the open-source Quantum ESPRESSO suite

...

=====

JOB DONE.

エラーメッセージな
してこれがが表示
されれば正常終
了

- ログファイル(標準出力)の内容の確認

...

```
the Fermi energy is 8.2612 ev
! total energy      = -4.18725738 Ry
```

エネルギーの値の確認

```
Harris-Foulkes estimate = -4.18725730 Ry
estimated scf accuracy  < 0.00000040 Ry
```

...

convergence has been achieved in 3 iterations

...

- リファレンスデータ(reference/al.scf.cg.out)との比較

PWのexampleの実行(4)



- MPIプロセス数=4 での実行

```
$ mpirun -n 4 pw.x < al.scf.cg.in
```

マシンに4コア以上ある場合

```
Program PWSCF v.6.3 starts on 27Mar2019 at 14: 0:53
```

...

```
Parallel version (MPI), running on 4 processors
```

```
R & G space division: proc/nbgrp/npool/nimage = 4
```

...

PWのexampleの実行(5)

- band計算

まず al.band.cg.in の計算

これは、scf で計算した charge density を用いて任意のk点に対するKohn-Sham軌道のエネルギーを計算する。

```
$ cat al.band.cg.in
&control
calculation='bands'
...
&system
ibrav= 2, celldm(1) =7.50, nat= 1, ntyp= 1,
ecutwfc =15.0, nbnd = 8
...
K_POINTS
28
0.0 0.0 0.0 1.0
0.0 0.0 0.1 1.0
...
$ pw.x < al.band.cg.in
```

バンド数は指定しなくても
良い。指定しないとデフォルト値になる。

書きたいband用にK点を取
り直す

PWのexampleの実行(6)

計算したKohn-Shamエネルギーをファイルにまとめる。

al.band_out.cg.in の作成(新しくファイルを作成する)

```
$ emacs al.band_out.cg.in  
al.band_out.cg.in ファイルの内容
```

&bands

```
outdir='/home/user/qe/examples/tempdir/',  
prefix='al',  
filband='al.band',  
lsym=.true.  
/
```

bands.x の実行 (pw.xではない)

```
$ bands.x < al.band_out.cg.in
```

...

=====

JOB DONE.

=====

al.band.rap, al.band, al.band.gnu のファイルができる。

ファイルがちゃんと出来ているか確認する。

```
$ ls
```

PWのexampleの実行(7)

al.band には、各k点ごとのKohn-Shamエネルギーのリストが“出力される。

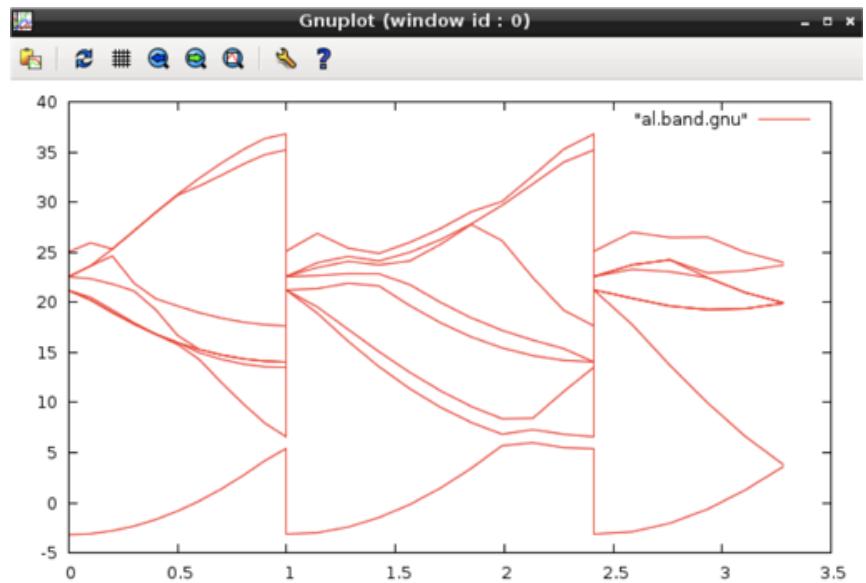
```
$ less al.band
&plot nbnd= 8, nks= 28 /
    0.000000 0.000000 0.000000
    -3.191 21.178 21.178 21.178 22.555 22.555 22.555 25.059
        0.000000 0.000000 0.100000
    -3.096 20.235 20.235 20.497 22.354 23.641 23.641 25.929
        0.000000 0.000000 0.200000
    -2.810 18.973 18.973 19.231 21.828 24.617 25.324 25.324
...
...
```

al.band.gnu には gnuplot でプロットしやすいよう加工されたデータが“出力される。

```
$ gnuplot
gnuplot> plot "al.band.gnu" w l
(注) w l は、with lines の略
```

gnuplot> quit

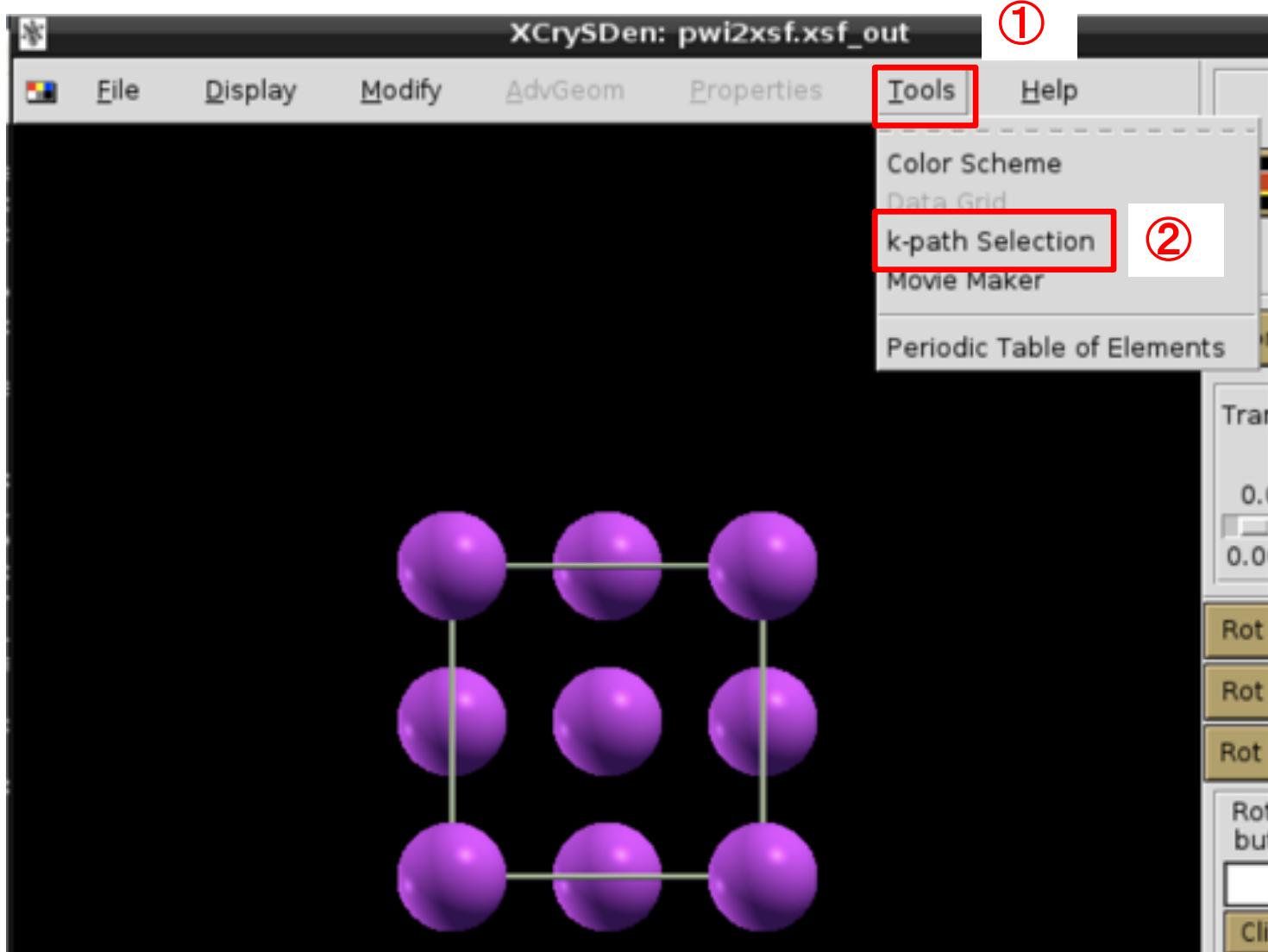
example ファイルだとK点が良
くないので、
取り直す。



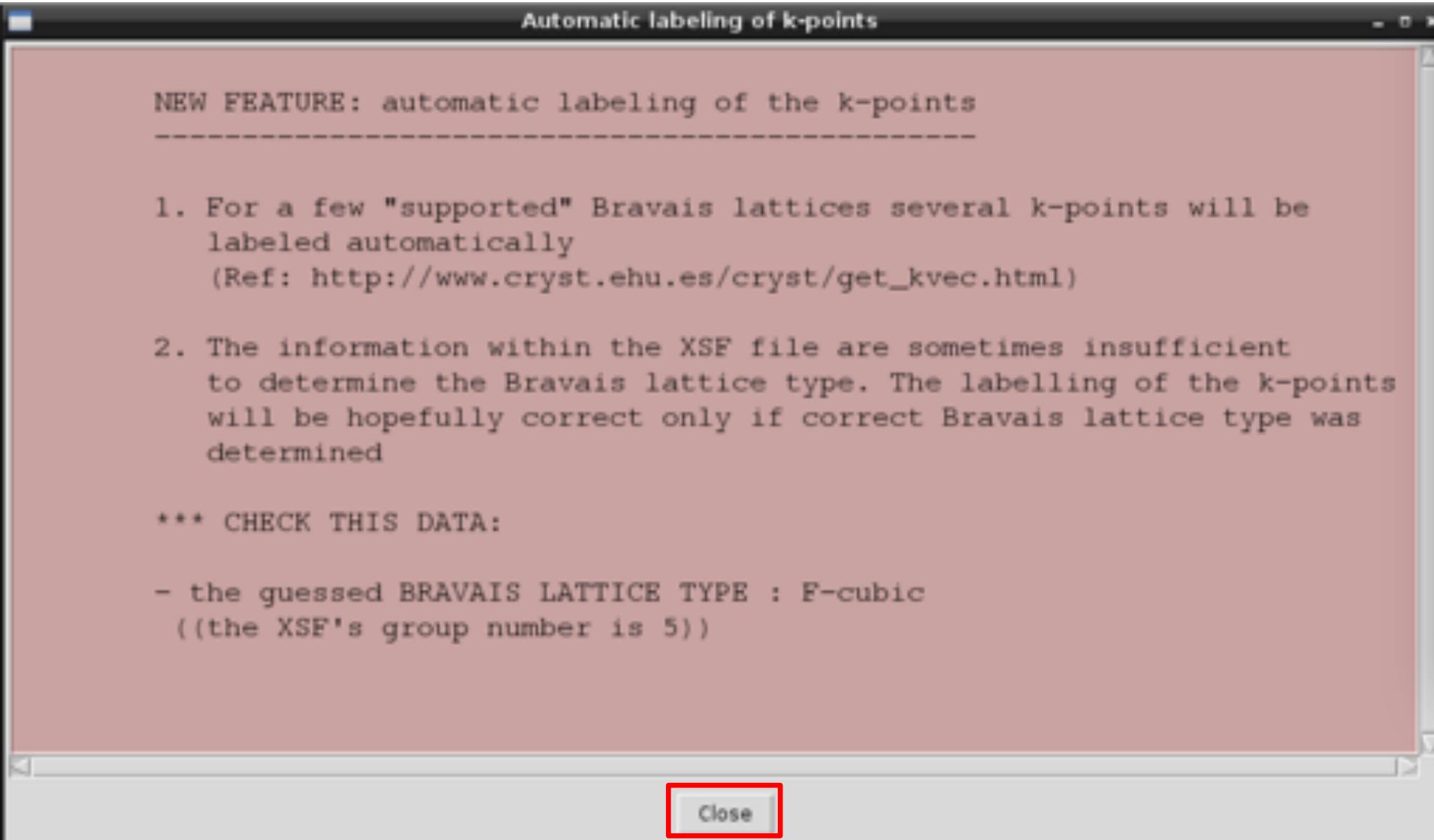
PWのexampleの実行(8)

XCrySDen でK点を作成する。

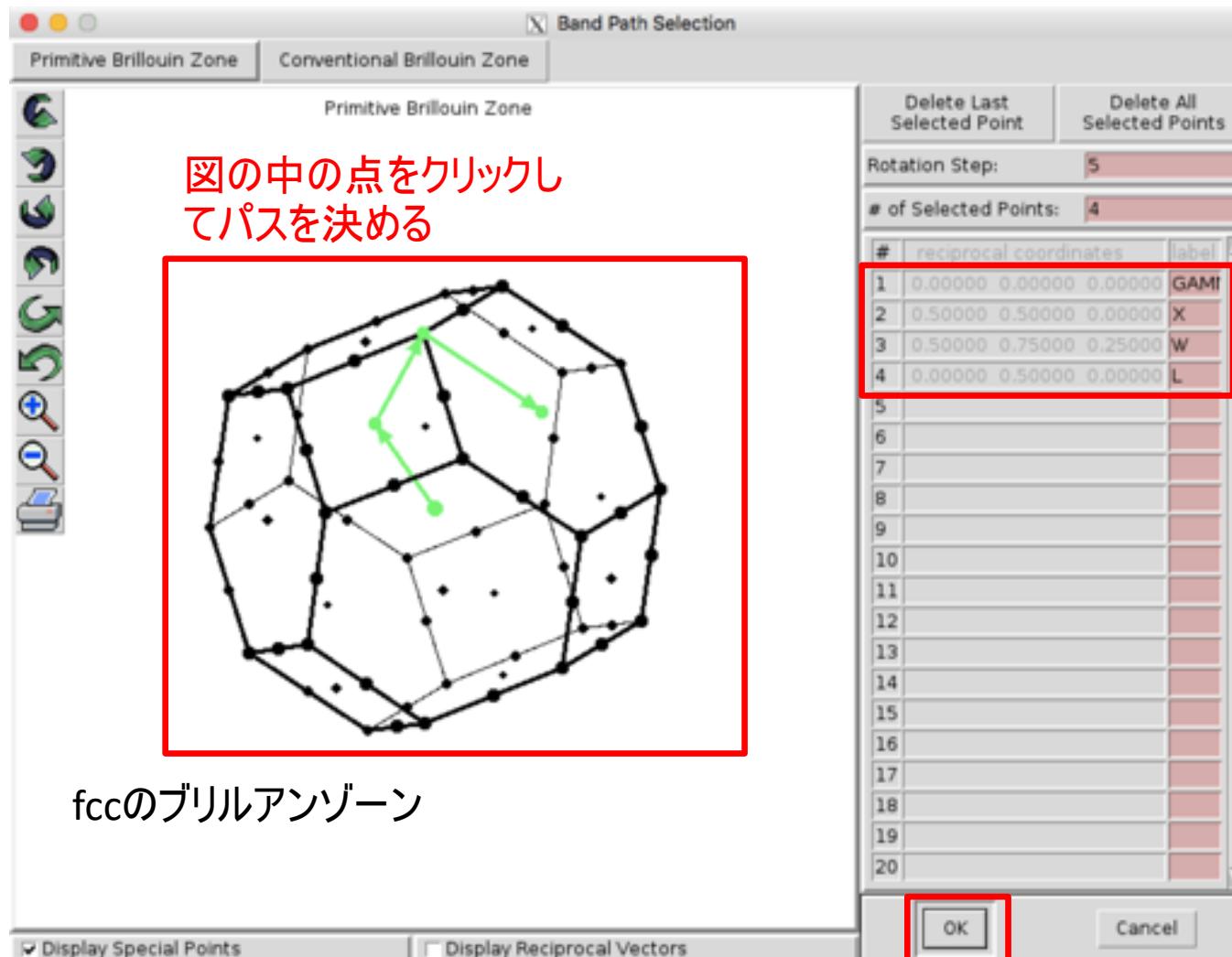
```
$ xcrysden --pwi al.scf.cgi
```



PWのexampleの実行(9)



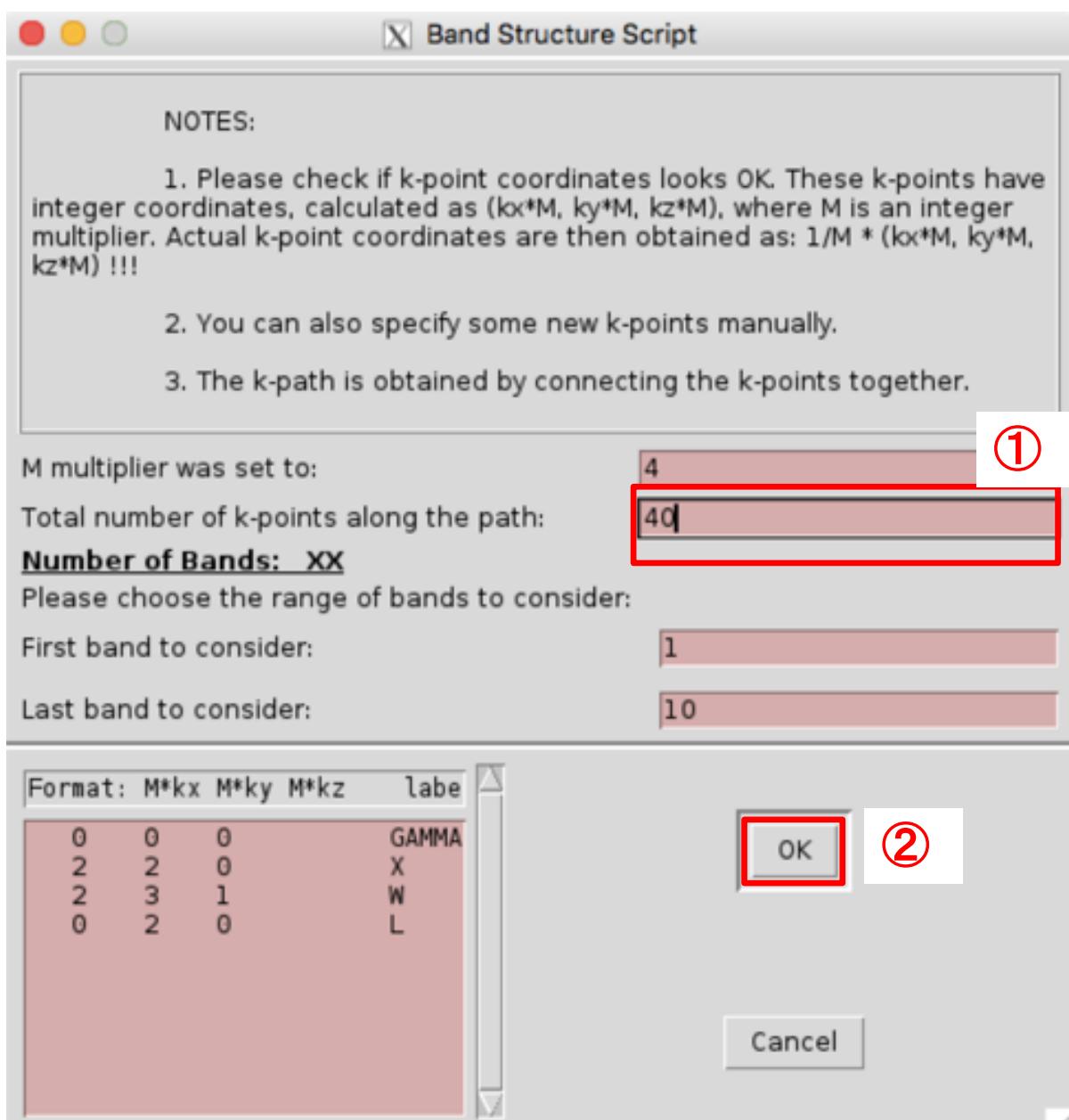
PWのexampleの実行(10)



絵を見ながら、K点パスを決めることができる。

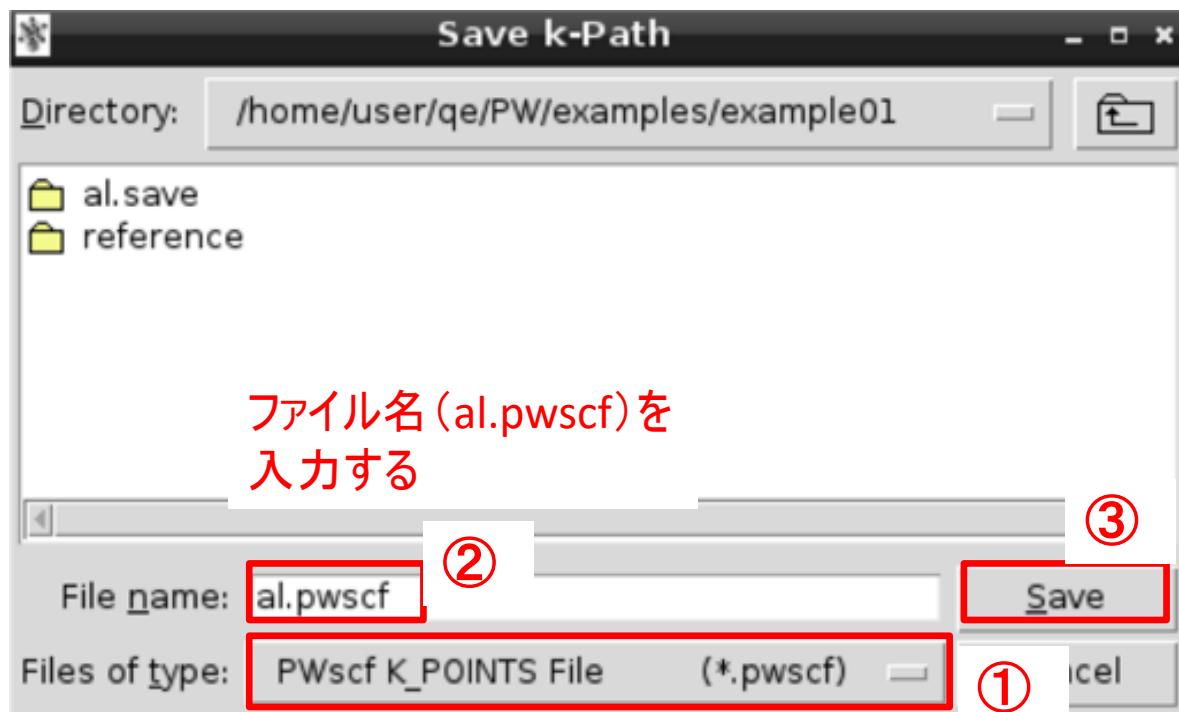
パス:「点(0, 0, 0)→X点(0.5, 0.5, 0.0)→W点(0.5, 0.75, 0.25)
→L点(0, 0.5, 0)

PWのexampleの実行(11)



全K点(分点)の数を
入力(この場合は40)
を入力する

PWのexampleの実行(12)



```
k-path: Supporting Information
=====
 * * * S U P P O R T I N G   I N F O R M A T I O N * * *
=====

BEWARE: the conversion of selected k-point coordinates to format
suitable for the PWscf is a new and untested feature.

!!! USE AT YOUR OWN RISK !!!
!!! PLEASE CHECK BELOW DATA FOR CONSISTENCY !!!

Number of selected k-points: 3

**ORIGINAL DATASET**
```

PWのexampleの実行(13)

al.band2.cg.in を作成する。(al.band.cg.in をコピーして作る。)

```
$ cp al.band.cg.in al.band2.cg.in
```

al.band2.cg.in の K_POINTS を al.pwscf の K_POINTS の内容に差し替える

```
$ emacs al.band2.cg.in
&control
  calculation='bands'
```

...

ATOMIC_POSITIONS

Al 0.00 0.00 0.00

K_POINTS crystal

40

0.0000000000 0.0000000000 0.0000000000 1.0

...

\$ pw.x < al.band2.cg.in

\$ bands.x < al.band_out.cg.in

al.band.gnu ファイルなどができる。

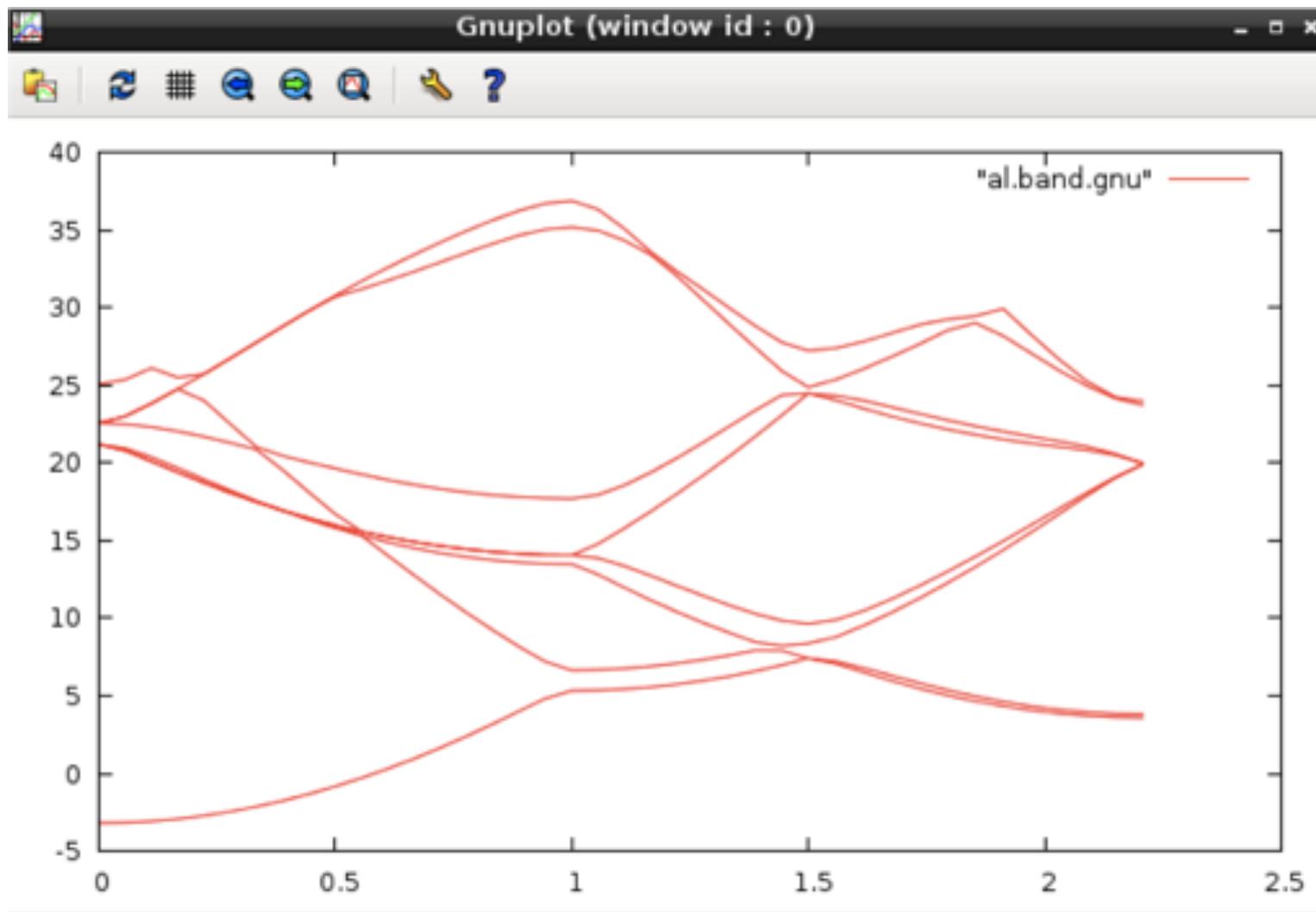
\$ gnuplot

gnuplot> plot "al.band.gnu" w l

このような指
定が一般的
→

K_POINTS tpiba_b
or
K_POINTS crystal_b
4
0.5000 0.5000 0.5000 50
0.0000 0.0000 0.0000 50
0.0000 0.5000 -0.5000 50
0.2500 0.7500 -0.2500 50

PWのexampleの実行(14)



PWのexampleの実行(15)

- DOS計算: Siのexample(si.scf.david.in)を用いる。
まず、si.scf.david.in をそのまま実行する。

```
$ pw.x < si.scf.david.in
```

...

```
=-----  
JOB DONE.  
=====
```

次に si.scf.in から si.nscf.david.in を作成する。

```
$ cp si.scf.david.in si.nscf.david.in
```

PWのexampleの実行(16)

si.nscf.david.in を編集する。

```
$ emacs si.nscf.david.in
&control
  calculation = 'nscf'          nscf で計算する
  restart_mode='from_scratch',
  prefix='silicon',
...
&system
  ibrav= 2, celldm(1) =10.20, nat= 2, ntyp= 1,
  ecutwfc=18.0,
  occupations='tetrahedra',      DOS を書くときは、tetrahedra にすると良い。
...
K_POINTS automatic
  8 8 8 1 1 1
```

si.nscf.david.in を実行する。

```
$ pw.x < si.nscf.david.in
```

tetrahedra のときは、automatic にする。

K_POINTS automatic

8 8 8 1 1 1: 8 × 8 × 8 のK点で「点を含まない
8 8 8 0 0 0: 8 × 8 × 8 のK点で「点を含む

↑ このような指定が一般的

PWのexampleの実行(17)

si.dos.david.in を作成する。(新しくファイルを作成する。)

```
$ emacs si.dos.david.in
```

si.dos.david.in ファイルの内容

```
&dos
```

```
outdir = '/home/user/qe/examples/tempdir/',  
prefix='silicon',
```

```
/
```

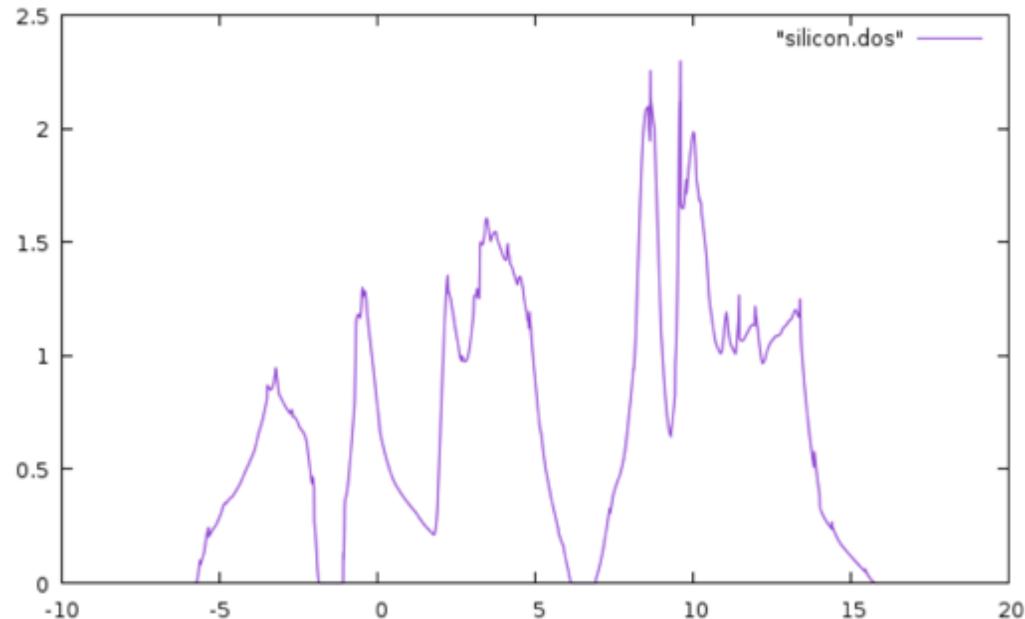
dos.x の実行 (pw.xではない)

```
$ dos.x < si.dos.david.in
```

silicon.dos ファイルが出来る。

```
$ gnuplot
```

```
gnuplot> plot "silicon.dos" w l
```



PWのexampleについて

- PW/examples/example01 以外を含む パッケージにある全ての examples の 解説は、PW/examples/README にある。
READMEを参照する。

```
$ cat PW/examples/README
```

...

LIST AND CONTENT OF THE EXAMPLES

For each example, more detailed information is provided by the README file
Contained in the corresponding directory.

Example01:

This example shows how to use pw.x to calculate the total energy
and the band structure of four simple systems: Si, Al, Cu, Ni.

Example02:

This example shows how to use pw.x to compute the equilibrium
geometry of a simple molecule, CO, and of an Al (001) slab.

In the latter case the relaxation is performed in two ways:

- 1) using the quasi-Newton BFGS algorithm
- 2) using a damped dynamics algorithm.

...

CPVのexampleの実行テスト

- CPV/examples/example01 へ移動する。

```
$ cd CPV/examples/example01
```

- ディレクトリの中のファイルの確認する。

```
$ ls
```

```
README reference run_example run_xml_example
```

- run_example のシェルスクリプトを実行する

```
$ ./run_example
```

```
/home/user/qe/examples/CPV/examples/example01 : starting
```

This example shows how to use cp.x to perform molecular dynamics simulation of SiO₂.

...

```
checking that needed directories and files exist... done
```

...

```
/home/user/qe/examples/CPV/examples/example01 : done
```

- 無事に終了すると results というディレクトリができる。

CPV/examples/example01(1)

SiO₂の計算

入力ファイル: sio2.cp.start.in

```
&control
  calculation='cp',
  restart_mode='from_scratch',
  nstep=20, iprint=20, isave=20,
  dt=5.0    time stepの設定
  ndr=90, ndw=91,
  pseudo_dir=':/usr/share/espresso/pseudo/',
  outdir='/home/user/qe/examples/tempdir/',
/
&system      ibrav=8:直方晶系
  ibrav=8, celldm(1)=9.28990, celldm(2)=1.73206, celldm(3)=1.09955,
  nat=18, ntyp=2, nbnd=48, nspin=1,
  ecutwfc=20.0, ecutrho=150.0,
  nr1b=16, nr2b=16, nr3b=16,
  qcutz=150., q2sigma=2.0, ecffixed=16.0,
/

```

CPMDを実行する
step数: 20
MD計算の出力の設定

time stepの設定

原子数: 18
原子種: 2
non-polarized

CPV/examples/example01(2)

入力ファイル: al.scf.cg.in (続き)

```
&electrons                                MD計算における設定
  electron_dynamics='damp', electron_damping=0.2,
  startingwfc='random', ampre=0.01,
  emass=700., emass_cutoff=3.,
/
&iions                                     イオンは固定する。
  ion_dynamics='none',
  ion_radius(1)=1.0, ion_radius(2)=1.0,
/
ATOMIC_SPECIES                            計算する元素と擬
  O  16.00 O.pz-rrkjus.UPF                  ポテンシャルの設定
  Si 28.00 Si.pz-vbc.UPF
ATOMIC_POSITIONS                           原子位置の設定
  O  3.18829368  14.83237039  1.22882961
  O  7.83231469   6.78704039  1.22882961
  O  2.07443467   5.99537992  4.73758250
...
  Si 6.77884003    4.23184358 -0.04188031
  Si 2.13389003    3.81348642  6.85202747
  Si 6.77884003   11.85881642  6.85202747
```

CPVについて

- CPV : Car-Parrinello molecular dynamics
詳しくは、CPMDのページ
<http://www.cpmd.org/>
を参照



The screenshot shows the homepage of the CPMD website. At the top, there is a navigation bar with links for "Site Map", "Accessibility", and "Contact". To the right of the navigation bar is a search bar with a placeholder "Search Site" and a "search" button. Below the search bar is a checkbox labeled "only in current section". The main title "CPMD" is prominently displayed in large blue letters, with a red Greek letter μ partially visible behind the "P". Below the title is a horizontal menu bar with links: "Home" (highlighted in blue), "The Code", "Download", "Docs", "Tutorial", "News", and "Events". A "Log in" button is located at the bottom right of the menu bar.

PHononのexampleの実行テスト

- PHonon/examples/example01 へ移動する。

```
$ cd PHonon/examples/example01
```

- ディレクトリの中のファイルの確認する。

```
$ ls
```

```
README reference run_example
```

- run_example のシェルスクリプトを実行する

```
$ ./run_example
```

```
/home/user/qe/examples/Phonon/examples/example01 : starting
```

This example shows how to use pw.x and ph.x to calculate phonon Frequencies at Gamma and X for Si and C in the diamond structure and For fcc-Ni.

```
...
```

```
/home/user/qe/examples/PHonon/examples/example01: done
```

- 無事に終了すると results というディレクトリができる。

PHonon/examples/example01



Siの計算

入力ファイル: si.phG.in

```
phonons of Si at Gamma
&inputph
  tr2_ph=1.0d-14,    収束条件
  prefix='silicon',
  epsil=.true.,
  amass(1)=28.08,    質量の設定
  outdir='/home/user/qe/examples/tempdir/',
  fildyn='si.dynG',  出力ファイルの設定
/
0.0 0.0 0.0          「点
```

PHononのexampleの実行(1)

- PHonon/examples/example01/results へ移動

```
$ cd PHonon/examples/example01/results
```

- ディレクトリの中のファイルの確認

```
$ ls
```

```
Cg.dyn  c.scf.out  ni.scf.in  si.phG.in  si.phXsingle.in  siX.dyn  
c.phG.in  matdyn  ni.scf.out  si.phG.out  si.phXsingle.out  
c.phG.out  ni.phX.in  niX.dyn  si.phX.in  si.scf.in  
c.scf.in  ni.phX.out  si.dynG  si.phX.out  si.scf.out
```

- この中で、今回 Si を計算する。
まず pw.x(電子状態計算)を行う。

```
$ pw.x < si.scf.in
```

PHononのexampleの実行(2)



次に ph.x(フォノン計算)を行う。

\$ ph.x < si.phG.in

リファレンスデータ(reference)との比較

さらに、「点以外のq点の計算をする。

si.phG.in をコピーして、si.ph.in を作成する。

\$ cp si.phG.in si.ph.in

si.ph.in を編集する。

\$ emacs si.ph.in

PHononのexampleの実行(3)

phonons of si

&inputph

tr2_ph=1.0d-14,

prefix='silicon',

amass(1)=28.08,

outdir='/home/user/qe/examples/tempdir',

fildyn='si.dyn', 出力ファイル名を si.dyn にする。

lisp=.true.

あるq点だけを計算する場合は、lisp=.false. にする。

nq1 = 4

nq2 = 4

nq3 = 4

フォノンのq点として、4x4x4 の
メッシュ点をとる

/

si.ph.in を実行する。

\$ ph.x < si.ph.in

(ある程度実行時間がかかる。)

PHononのexampleの実行(4)

ph.x で計算した dynamical matrix を実空間にフーリエ変換するために
q2r.x を実行する

si.q2r.in を作成する。(新しくファイルを作成する。)

```
$ emacs si.q2r.in
```

si.q2r.in ファイルの内容

```
&input
  fildyn = 'si.dyn'
  flfrc = 'si.fc'
  /
  
```

si.q2r.in の実行

```
$ q2r.x < si.q2r.in
```

DOSを計算する。

si.matdyn-dos.in を作成する。(新しくファイルを作成する。)

```
$ emacs si.matdyn-dos.in
```

PHononのexampleの実行(5)

si.matdyn-dos.in ファイルの内容

```
&input
asr='simple',
dos=.true.,
amass(1)=28.08,
flfrc='si.fc',
fldos='si.phdos',
nk1=12,nk2=12,nk3=12,
/
```

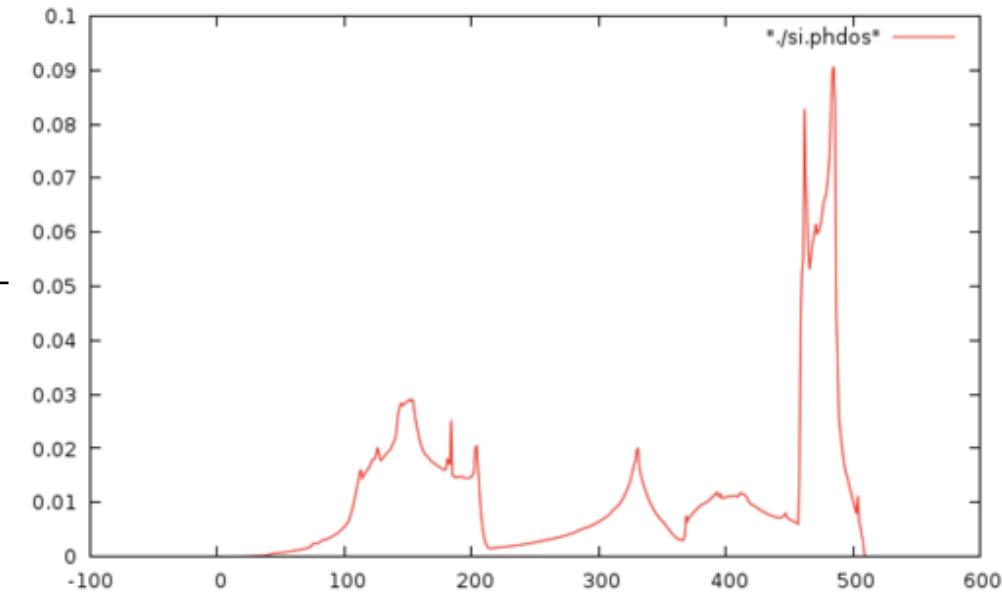
si.matdyn-dos.in を実行する。

\$ matdyn.x < si.matdyn-dos.in

si.phdos ファイルが出来る。

\$ gnuplot

gnuplot> plot "si.phdos" w l



PHononのexampleの実行(6)

band を計算する。

si.matdyn-disp.in を作成する。(新しくファイルを作成する。)

```
$ emacs si.matdyn-disp.in
```

si.matdyn-disp.in ファイルの内容

```
&input
asr='simple',
dos=.false.,
amass(1)=28.08,
flfrc='si.fc',
flfrq='si.freq',
flvec='si.modes',
q_in_band_form=.true.,
/
5
0.0 0.0 0.0 20
1.0 0.0 0.0 20
1.0 1.0 0.0 20
0.0 0.0 0.0 20
0.5 0.5 0.5 20
```

PHononのexampleの実行(7)

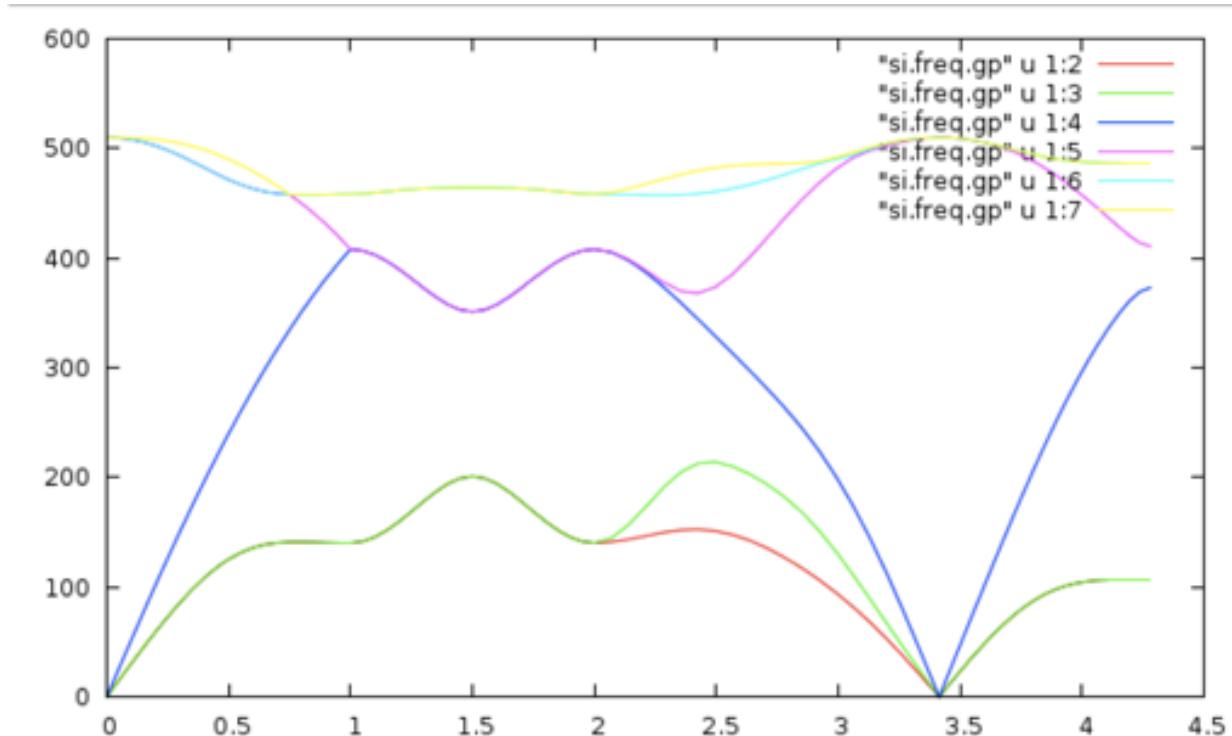
si.matdyn-disp.in を実行する。

\$ matdyn.x < si.matdyn-disp.in

si.freq.gp ファイルが出来る。

\$ gnuplot

```
gnuplot> plot "si.freq.gp" u 1:2 w l, "si.freq.gp" u 1:3 w l, "si.freq.gp" u 1:4  
w l, "si.freq.gp" u 1:5 w l, "si.freq.gp" u 1:6 w l, "si.freq.gp" u 1:7 w l
```



サイズを大きくした計算例(1)

- セルサイズや原子数を増やした計算には時間がかかる。
→ あらかじめ実行時間や、実行時に指定する並列数などを確認しておくと良い。
- 実行時間の調査

Quantum ESPRESSO (QE) の開発グループが公開している
ベンチマーク用入力データ

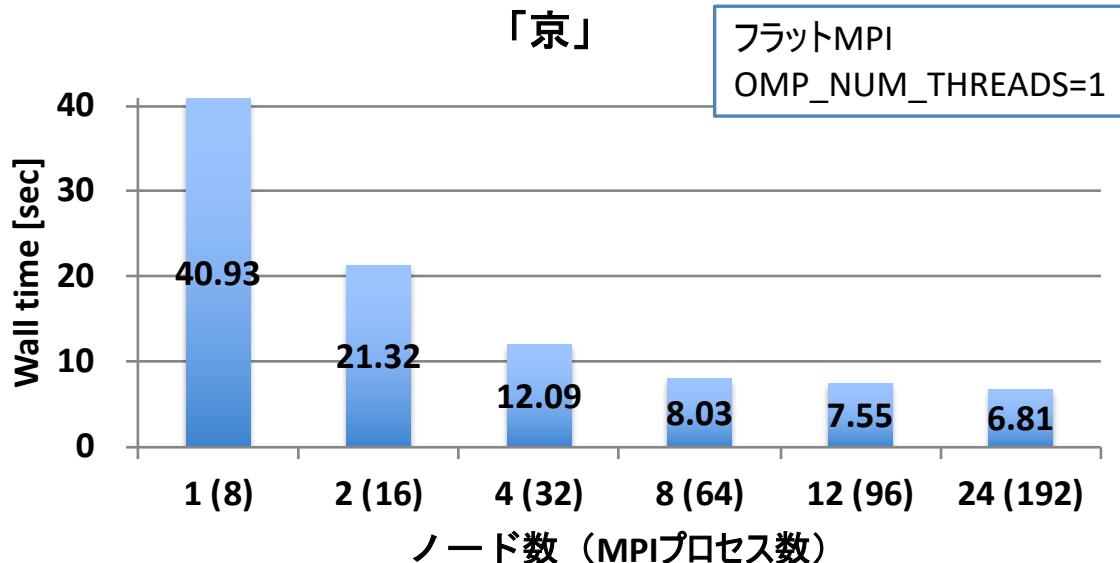
<https://github.com/QEF/benchmarks>

ホームページで、公開されている同じ入力ファイルで実行時間を測定する

- 例) Small-size(pwscf-small-benchmark.tar.gz)の中の test_1.in

原子種 : C, O, N, H

28 atoms、1 step、14 scf



公開されているデータと比較することにより、自分の実行環境での QE の性能評価の目安になる。
→ すごく遅いようであれば、QE の構築(ビルド)方法を再検討する

サイズを大きくした計算例(2)

最適な(に近い)実行

→ どれくらいのMPIプロセス数や、スレッド数で実行すれば良いのか？

フラットMPIとハイブリッド並列の比較

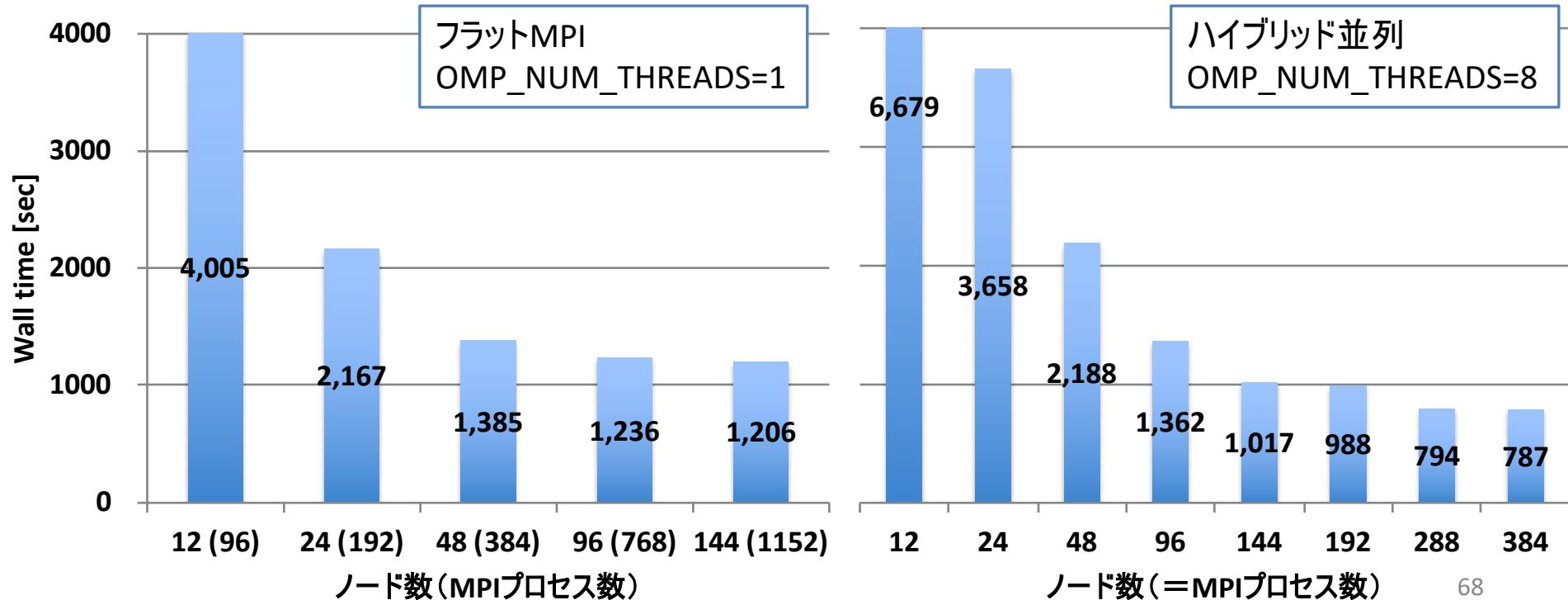
MPIプロセス数を変えて実行時間を測定 → 実行時に指定するプロセス数を検討

Large-size DEISA benchmark (PSIWAT.tgz)

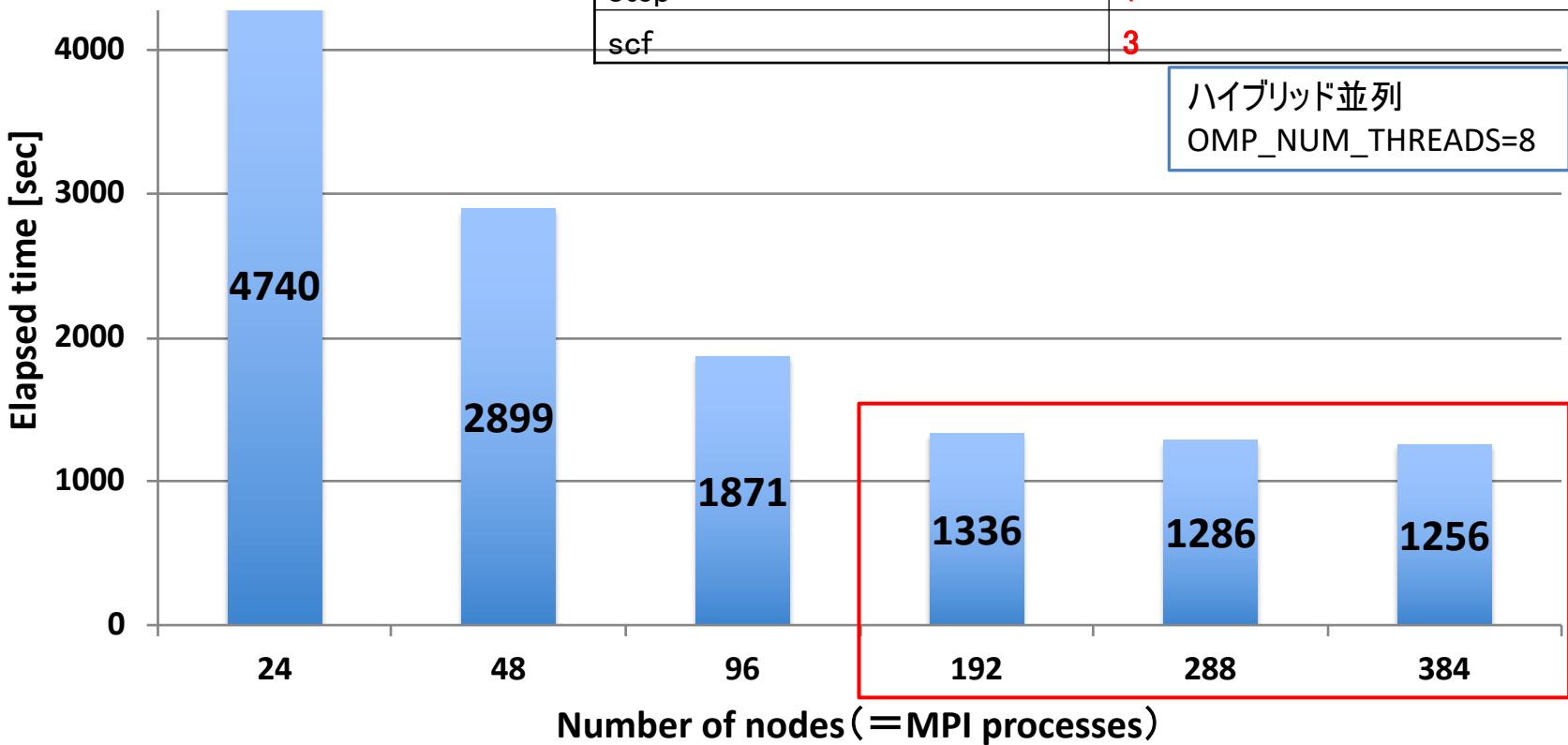
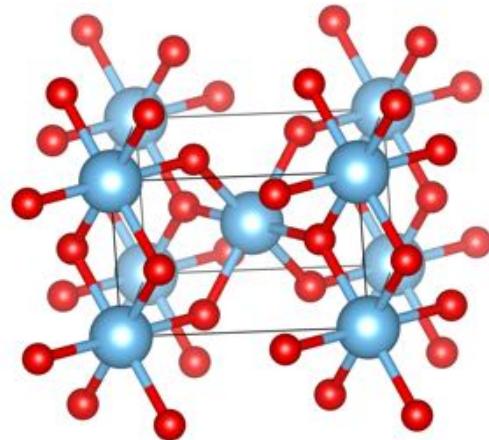
原子種: Au, O, C, N, H

586 atoms、1 step、5 scf

このサイズの計算では、「京」、
HPCが必要になってくる。



サイズを大きくした計算例(3)



- MPI processes = **192** → saturation

サイズを大きくした計算例(4)

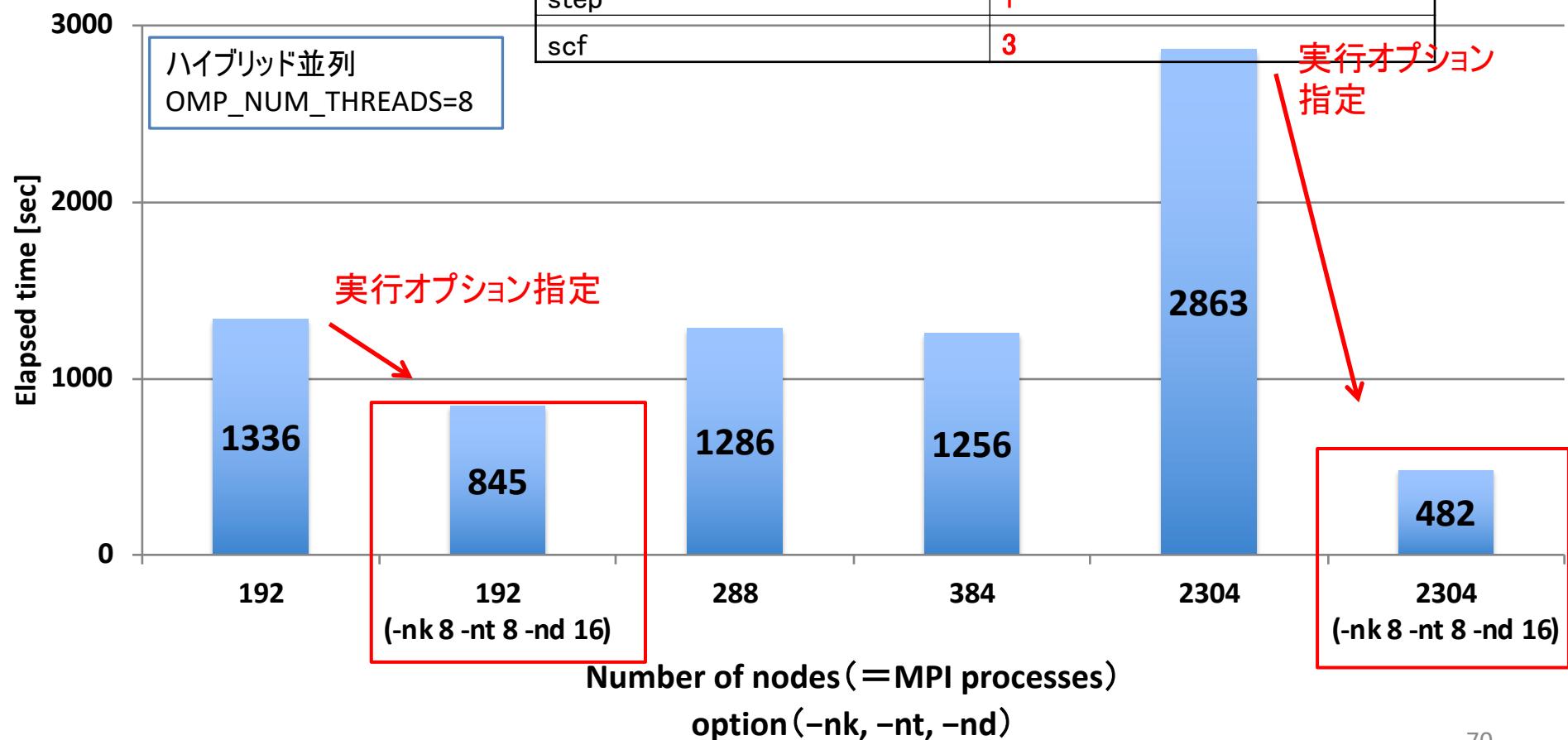
実行オプション

-nk : k-point parallel

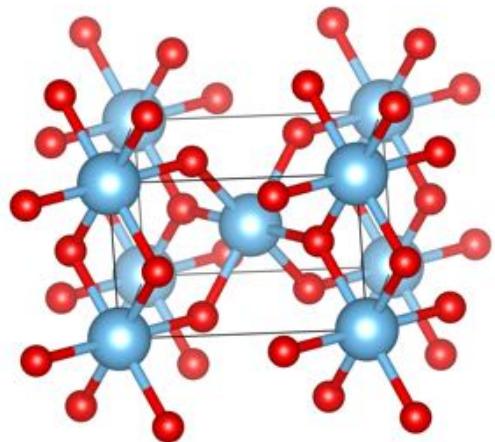
-nt : FFT parallel

-nd : subspace Hamiltonian

Target	rutile TiO ₂ + impurity hydrogen
Size	217 atoms per unit cell
exchange correlation functional	GGA(PBE)
k point	3 x 3 x 3 (irreducible: 14 points)
step	1
scf	3



サイズを大きくした計算例(5)



Target	rutile TiO_2 + impurity hydrogen
Size	217 atoms per unit cell
exchange correlation functional	GGA (PBE)
k point	$3 \times 3 \times 3$ (irreducible: 14 points)
step	1
scf	3

→ より良い実行

ノード数 (= MPI プロセス数) : 192

スレッド数 : 8

実行時オプション : (-nk 8 -nt 8 -nd 16)

→ 計算規模(セルサイズ、原子数など)によって、適した実行方法は変わる。



このような調査は、RISTの
高度化支援へ